

УДК 537.311.33

© 1992

ЭЛЕКТРОННЫЙ СПЕКТР ДЕФЕКТОВ С ДЕЛЬТАОБРАЗНЫМ ПОТЕНЦИАЛОМ В ТОНКИХ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ ПЛЕНКАХ

Э. Л. Нагаев

Дискретные электронные уровни дефектов с дельтаобразным потенциалом размываются в пленке в полосу из-за поверхностного потенциала и ограничения пространства, доступного электрону. Кроссовер от двумерного к трехмерному поведению проявляется в резком ускорении сдвига уровня с ростом потенциала дефекта после достижения им критического значения.

Специфика локализованных состояний в полупроводниковых пленках определяется тем фактом, что электронные орбиты оказываются усеченными благодаря поверхностям пленок. Из-за этого оказывается уменьшенным пространство, доступное электрону. С другой стороны, потенциал на поверхности иной, чем в объеме. По обеим этим причинам локальные уровни, создаваемые одним и тем же дефектом, должны располагаться в пленке иначе, чем в массивном образце. Разумеется, делокализованные состояния в пленке тоже должны быть сдвинуты по сравнению с массивным образцом. Однако этот сдвиг определяется единственным размерным параметром a/L , где L — толщина пленки, a — межатомное расстояние, каковой порядок величины имеет и характерная длина поверхностного потенциала. Сдвиг же дискретного уровня должен зависеть еще и от отношения R/d , где R — радиус примесного состояния, d — расстояние от примесного центра до поверхности.

Роль второго параметра достаточно очевидна: если дефект расположен на расстоянии $d \gg R$ от поверхности, то электрон дефекта ее не чувствует. Если же дефект лежит на самой поверхности, то его электрону доступна только половина пространства, доступного для локализованного электрона в глубине пленки. Но зато электрон, локализованный на поверхности, чувствует потенциал поверхности. Зависимость глубины локального уровня от положения дефекта приводит к расширению его в полосу. Такой механизм уширения радикально отличен от обычного объемного механизма уширения дискретного уровня за счет взаимодействия электрона с другими квазичастицами (фононами и т. д.).

При исследовании дефектов в полупроводниковых пленках возникает и проблема кроссовера от двумерного к трехмерному поведению по мере увеличения толщины пленки. Такой кроссовер должен происходить, если потенциал дефекта дельтаобразен: в двумерном случае дискретный уровень появляется при сколь угодно слабом притягивающем потенциале дефекта, а в трехмерном — только начиная с некоторого критического значения [1]. Ниже будет выяснен характер такого кроссовера и будет показано, что формально дискретные уровни в пленке появляются тоже при любой величине потенциала дефектов, однако существует его критическое значение, ниже которого глубина уровней экспоненциально убывает с ростом толщины пленки, а выше — от толщины не зависит.

Расчет дискретных уровней энергии дефектов с притягивающим дельтаобразным потенциалом в пленке производится по той же схеме, что и расчет спектра электронов в малых частицах с хаотическим отталкивающим потенциалом [2]. Рассматривается плоскопараллельная пластина с простой кубической решеткой, ограниченная плоскостями (100). Ее толщина по оси z составляет $L = 2l + 1$ постоянных решеток a . В приближении ближайших соседей электронный гамильтониан имеет вид

$$H = U_0 \sum_S a_S^* a_S + B \sum_{g, g'} a_g^* a_{g'} + U a_m^* a_m, \quad (1)$$

где $a_g^* a_g$ — операторы рождения и уничтожения электрона на узле с номером g (спиновый индекс опущен); индексами S обозначены атомы в первом поверхностном слое; штрих над суммой по g и g' означает, что суммирование производится по ближайшим соседям. Индексом $m = (0, 0, m)$ обозначены координаты дефекта с дельтаобразным потенциалом величины U .

Наличие поверхности, задаваемой, кроме обрыва связей атомов с их соседями «по ту» ее сторону, еще и поверхностным потенциалом U_0 , проще всего учесть, проведя каноническое преобразование электронных операторов, диагонализующее идеальную часть гамильтониана H , т. е. первые два члена в правой части (1)

$$a_g = N^{-1/2} \sum_{qp} \exp(iq \cdot \rho) f(p, h) a_{qp}, \quad (2)$$

где $g = (\rho, h)$, через f обозначены тригонометрические функции

$$f(p_s, h) = \{2/[L(1 - \chi_{p_s})]\}^{1/2} \sin p_s h$$

или

$$f(p_c, h) = \{2/[L(1 + \chi_{p_c})]\}^{1/2} \cos p_c h \quad (3)$$

(N — число атомов на поверхности) и введено обозначение

$$\chi_p = (\sin pL)/L \sin p. \quad (4)$$

Дозволенные значения импульсов $p = p_s$ или p_c , по которым в (2) производится суммирование, согласно (1)–(3), определяются из соотношений

$$lp_s = \pi n_s + \text{arctg} Q(p_s),$$

$$lp_c = \pi n_c - \text{arctg} Q(p_c), \quad (5)$$

где приняты обозначения

$$Q(p) = (\nu - \cos p)/\sin p, \quad \nu = U_0/B, \quad l = (L-1)/2.$$

Целые числа n_s и n_c в (5) удовлетворяют условию, что импульсы p_s и p_c принадлежат интервалу $[0, \pi]$. Формулы (5) предполагают, что поверхностный потенциал U_0 недостаточно сильный для появления в спектре идеального кристалла поверхностных зон, для чего должно выполняться неравенство $|V| \ll 1$.

Трансцендентные уравнения (5) могут быть решены точно для некоторых значений ν :

1) $\nu = 0$

$$p_s = \frac{\pi n_s}{l+1}, \quad (0 < n_s < l),$$

$$p_c = \frac{\pi (n_c + 1/2)}{l + 1}, \quad (0 \leq n_c \leq l), \quad (6)$$

2) $\nu = 1$

$$p_s = \frac{\pi (n_s + 1/2)}{l + 1/2}, \quad (0 \leq n_s < l),$$

$$p_c = \frac{\pi n_c}{l + 1/2}, \quad (0 \leq n_c \leq l), \quad (7)$$

3) $\nu = -1$

$$p_s = \frac{\pi n_s}{l + 1/2}, \quad (0 < n_s \leq l),$$

$$p_c = \frac{\pi (n_c + 1/2)}{l + 1/2}, \quad (0 \leq n_c \leq l). \quad (8)$$

В результате преобразования (2)–(5) гамильтониан (1) принимает вид

$$H = \sum_{pq} E_{pq} a_{pq}^* a_{pq} + U \sum_{pq} \sum_{p'q'} f(p, m) f(p', m) a_{pq}^* a_{p'q'}, \quad (9)$$

$$E_{pq} = 2B (\cos q_x + \cos q_y + \cos p). \quad (10)$$

Из (9) легко получить точное уравнение для определения дискретного уровня, являющееся непосредственным обобщением известного результата И. М. Лифшица [1] для бесконечно больших кристаллов. Для этого следует написать уравнение движения для одноэлектронной запаздывающей функции Грина

$$(E - E_{pq}) \langle\langle a_{pq} | a_{p'q}' \rangle\rangle = \delta_{pp'} \delta_{qq'} + U f(p, m) X,$$

$$X = \sum_{p''q''} f(p'', m) \langle\langle a_{p''q''} | a_{p'q}' \rangle\rangle \quad (11)$$

и решить интегральное уравнение (11). В результате получается

$$\frac{U}{N} \sum_{pq} \frac{f^2(p, m)}{E - E_{pq}} = 1. \quad (12)$$

Интеграция по q в (12) после подстановки в это равенство формулы (10) производится с использованием преобразования Лапласа, что дает

$$1 = \frac{u}{\pi} \sum_p f^2(p, m) kK(k) \equiv uY(m), \quad (13)$$

где приняты обозначения: K — полный эллиптический интеграл первого рода, $\epsilon = E/2B$, $u = U/2B$, $k = 2(\epsilon - \cos p)^{-1}$. Для определенности считается, что минимум зоны проводимости лежит в центре зоны Бриллюэна ($B < 0$).

Очевидно, энергетический спектр бездефектной пластины состоит из набора двумерных подзон, образующих зону проводимости. Проводимый ниже анализ условия существования дискретного уровня предполагает, что он расположен ниже дна наиболее низкой из подзон зоны проводимости на расстоянии $2B\lambda$, малом по сравнению с расстоянием между минимумами наиболее низкой ($p = p_1$) и следующей за ней подзоны ($p = p_2$)

$$\lambda = \varepsilon - 2 - \cos p_1 \leq \cos p_1 - \cos p_2, \quad (14)$$

где p_1 — наименьший (при данном ν) из импульсов, даваемых выражениями (5)—(8), и аналогично определяется p_2 .

При наложенном выше условии на λ достаточно учесть эту величину в члене с $p = p_1$ в выражении (13), поскольку он логарифмически расходится при $\lambda \rightarrow 0$. В остальных же членах можно положить $\lambda = 0$. Тогда получается

$$\lambda(m) = 16 \exp \left\{ -2\pi [u^{-1} - \mathcal{F}(m)] / f^2(p_1, m) \right\}, \quad (15)$$

где приняты обозначения

$$\mathcal{F}(m) = \frac{1}{\pi} \sum_{p_2} f^2(p, m) k_1 K(k_1),$$

$$k_1 = 2(2 + \cos p_1 - \cos p)^{-1}. \quad (16)$$

Как следует из (15), дискретный уровень существует формально при любых примесных потенциалах u . Однако при u , меньших критического значения $u_c = \mathcal{F}^{-1}$, его глубина экспоненциально мала по $(u^{-1} - u_c^{-1})L$. Таким образом, при достаточно больших L происходит пиннинг локального уровня к дну зоны проводимости.

В рассматриваемом пределе $L \gg 1$ при вычислении \mathcal{F} в главном приближении по $1/L$ можно заменить суммирование по p в (16) интегрированием. В результате этого зависимость \mathcal{F} от m исчезает, а сама величина \mathcal{F} сводится к хорошо известному интегралу Ватсона, равному 0.49. Таким образом, если $L \rightarrow \infty$, при $u = u_c$ происходит отщепление дискретного уровня от дна зоны проводимости. В образцах с большим L отщепление дискретного уровня происходит как фазовый переход в электронном спектре. При конечных L этот фазовый переход оказывается размытым и его ширина обратно пропорциональна L .

В противоположном пределе $L = 1$ разрешено только одно значение p , равное p_1 , и величина \mathcal{F} обращается в нуль. Тогда выражение (15) оказывается годным при всех $\lambda \ll 1$. Обращает на себя внимание тот факт, что глубина уровня остается неаналитической функцией u и в двумерном случае.

При промежуточных значениях L значение предельного потенциала, начиная с которого появляется дискретный уровень, зависит от координаты дефекта m . Пользуясь (16) и (6)—(8), получаем следующие выражения для $\mathcal{F}(m)$ при $L = 3$, когда m принимает значения 0, ± 1 :

1) при $\nu = 0$

$$\mathcal{F}(m) = \frac{1}{2\pi} \left[1.335 \sin^2 \frac{m\pi}{2} + 0.963 \cos^2 \frac{3m\pi}{4} \right], \quad (17)$$

2) при $\nu = 1$

$$\mathcal{F}(m) = \frac{2}{3\pi} \left[1.6 \sin^2 \frac{m\pi}{3} + 0.99 \cos^2 \frac{2m\pi}{3} \right], \quad (18)$$

3) при $\nu = -1$

$$\mathcal{F}(m) = \frac{2}{3\pi} \left[1.2 \sin^2 \frac{m\pi}{3} + 0.98 \cos^2 m\pi \right]. \quad (19)$$

Согласно (17)—(19), величина $u_c(0)$ превышает $u_c(1)$ в 2 раза при $\nu = 0$, в 1.5 раза при $\nu = 1$ и в 2 раза при $\nu = -1$. Однако при малых L формирование

дискретного уровня ν с ростом u оказывается процессом достаточно размытым. Поэтому из сказанного не следует, что один и тот же примесный потенциал u обязательно вызывает появление более глубокого уровня на поверхности ($m = \pm 1$), чем в объеме ($m = 0$). Это связано с тем, что показатель экспоненты в (15) при $m = 1$ в $(\cos^{-2} p_1)$ раз больше, чем при $m = 0$. С учетом указанного факта получается, что при $\nu = 0$ мелкий поверхностный примесный уровень лежит выше, чем внутри объема.

Сделанный вывод подтверждается численным расчетом для случая $l = 5$, $\nu = 0$. Уровню с $\varepsilon = 2.966$, лежащему в непосредственной близости от дна зоны проводимости, соответствуют значения потенциала $U(m)$, монотонно возрастающие по мере приближения к поверхности. Отношение потенциала $U(5)$, вызывающего появление такого уровня на поверхности, к потенциалу $U(0)$, вызывающему появление уровня той же глубины внутри пленки, составляет 1.5.

Если же потенциал дефекта фиксирован и если он создает на поверхности дискретный уровень с $\varepsilon = 2.966$, то внутри объема ($m = 0$) тот же потенциал создает дискретный уровень с $\varepsilon = 3$. Таким образом, при $|B| \approx 0.5$ эВ перенос дефекта с поверхности внутрь объема приводит к понижению его уровня на ~ 0.03 эВ. Таким образом, ансамблю дефектов, хаотически расположенных в пленке, вместо единого дискретного уровня соответствует целый их набор, образующий полосу. В обсужденном выше случае ширина этой полосы сравнима с глубиной уровня.

При $\nu = 0$ расщепление примесного уровня обусловлено всецело тем фактом, что по мере удаления дефекта от поверхности увеличивается пространство, доступное для его электрона. Еще более сильно сказывается на расщеплении дискретного уровня поверхностный потенциал. Чтобы убедиться в этом, достаточно рассмотреть предел $u \gg 1$. В нем глубина локального уровня зависит от m в первом порядке по $1/u$, если $\nu \neq 0$, и только во втором порядке, если $\nu = 0$. Действительно, как следует из (13), в этом пределе

$$\begin{aligned} \varepsilon(m) = & u + \frac{1}{\varepsilon} \sum_p f^2(p, m) \cos p + \frac{u}{4\varepsilon^3} + \\ & + \frac{1}{\varepsilon^2} \sum_p f^2(p, m) \cos^2 p + O\left(\frac{1}{u^3}\right). \end{aligned} \quad (20)$$

Как следует из (20), (6)–(8), при $\nu = \pm 1$ соответственно получаются следующие выражения для энергии:

$$\begin{aligned} \varepsilon(0) &= u \pm 1/3u + O(u^{-2}), \\ \varepsilon(1) &= u \pm 5/6u + O(u^{-2}). \end{aligned} \quad (21)$$

При $\nu = 0$ аналогичные выражения для энергии таковы:

$$\begin{aligned} \varepsilon(0) &= u + 1/4u^2 + O(u^{-3}), \\ \varepsilon(1) &= u + 1/8u^2 + O(u^{-3}). \end{aligned} \quad (22)$$

Согласно (21), (22), при отталкивающем потенциале поверхности ($\nu = -1$) или при его отсутствии ($\nu = 0$), примесный уровень на поверхности лежит выше, чем в объеме. При притягивающем же потенциале поверхности ($\nu = 1$), напротив, уровень дефекта на поверхности ниже, чем в объеме. Физический смысл этого вполне очевиден.

Список литературы

- 1] Лифшиц И. М. // ЖЭТФ. 1947. Т. 17 № 11 С. 1017—1025; № 12. С. 1076—1089.
- 2] Нагаев Э. Л. // ЖЭТФ. 1990. Т. 98. № 4(10). С. 1442—1453.

Государственное научно-производственное
предприятие «Квант»
Москва

Поступило в Редакцию
1 апреля 1992 г.
